# 非断熱位相操作を用いた量子波制御(第51回 物性若手夏の学校(2006年度))



萱沼, 洋輔

# 非断熱位相操作を用いた量子波制御

大阪府立大学工学研究科　萱沼洋輔

## §1.　はじめに

前世紀の初めにプランクやアインシュタインによりその露頭が発見された量子力学は、1世紀あまりの間に様々な技術を生み出し産業構造を根底から変革した。半導体、レーザー、超伝導、原子力など（核兵器という負の産物も含めて）量子力学の原理に基づく科学技術は枚挙にいとまがない。それらは基本的には自然から与えられた素材の驚くべき特性を生かすことで達成された成果といえるだろう。

これに対し、近年、われわれはまだ量子力学そのものの持つ可能性を十分に使いきっていないのではないか、という認識がひろまりつつある。量子効果デバイス、量子通信、量子暗号、量子コンピュータなどの未来型技術は、重ね合わせの原理とか、遠隔絡み合いとかいった量子力学が本来持っていた「奇妙な」性質を、新たなリソース（資源）と見なすところから発想された。これらの新規技術は、既存の技術と競合して打ち勝ち、最終的には市場原理の淘汰にも耐えて産業として成り立つまでには、まだまだ道のり遥かな萌芽的な状態にあると言えるだろうが、物理研究者の立場からは量子力学をより深く理解する道を開いてくれた点に意味があると私は考えている。

量子系を操って様々な機能を発現させようとするとき、われわれに操作できるのは無限に重いマクロな自由度としての「外場」であり、波動関数はシュレーディンガー方程式を通じて間接的に駆動される。これを外場による量子駆動問題と名づける。時間をあらわに含む量子駆動問題は基底状態や熱平衡状態の性質を問う従来の問題とは全く異なる新しいタイプの問題である。このことは、最も単純な量子系である2準位系の定常状態はトリビアルに求められるのに、時間にあらわに依存するパラメタを含む時間発展問題の一般解は求められない、という事実からも明らかであろう。ましてや、相互作用する多体系の量子駆動問題などはほとんど手付かずの状態である。

この講義では、単純な「解ける」量子駆動問題としてのLandau-Zener遷移の復習からはじめて、その発展として非断熱遷移と位相干渉の関わるいくつかの問題について紹介し、応用例の一つとして位相干渉効果を用いた新しいqubit操作の提案を行う。

## §2. Landau-Zener公式と転送行列

Landau-Zener公式は、本来は原子・分子の非弾性散乱の解析を目的として１９３０年代に導入され[1,2]、もっぱらその分野で使われてきた。しかし問題の設定そのものはきわめて一般的であり、量子駆動問題の解析に有用であることがこの１０年ほどの間に認識されるようになった[3]。

図1に示すような、ハミルトニアン

$$H(t)=\frac{1}{2}vt(|1\rangle\langle 1|-|2\rangle\langle 2|)+\Delta(|1\rangle\langle 2|+|2\rangle\langle 1|) \qquad (1)$$

で記述される2準位交差系の時間発展を考える。交差直前と直後の状態ベクトルをそれぞれ

$|\psi_{in}\rangle=C_1^{in}|1\rangle+C_2^{in}|2\rangle$、$|\psi_{out}\rangle=C_1^{out}|1\rangle+C_2^{out}|2\rangle$ と書けば、係数$(C_1^{in},C_2^{in})^T$ と$(C_1^{out},C_2^{out})^T$は転送

行列

$$M=\begin{pmatrix}\sqrt{q} & \sqrt{1-q}e^{-i\phi}\\ -\sqrt{1-q}e^{i\phi} & \sqrt{q}\end{pmatrix}$$

で結ばれる。ただし、$q=\exp[-2\pi\Delta^2/\hbar v]$で、$\phi$はストークスの位相とよばれる幾何学的位相[4]である。転送行列は$|\psi_{in}\rangle$と$|\psi_{out}\rangle$の間の位相関係まで厳密に与えることに注意しておこう。講義ではこの公式の導出もしておく。

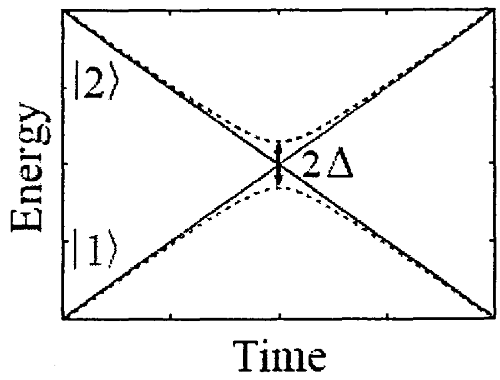


図1

§3．非断熱過程のモジュール化

上に述べたのは2準位が無限のエネルギー差から近づき、一定速度で交差するという理想的な状況に対する厳密解であるが、さまざまな経験から、転送行列による解析は、より一般的な状況でもよい近似解を与えることが分かっている。すなわち、図2のように複雑な非断熱準位交差を繰り返す系の時間発展も、非対角相互作用が極端に大きくなければ、瞬間的なLandau-Zener型非断熱遷移と、その間を結ぶ自由発展における動力学位相獲得との二つに分離して処理できる。これを「非断熱過程のモジュール化」とよぶことにする。

系がある状態から出発して、図のような交差を繰り返し様々な経路をたどって時間発展したとき、経路間の位相干渉が重要な役割を果たすことになる。つぎにそのような例をいくつか見てみよう。

§4．転送行列の応用

4.1　トンネル効果の凍結

Grossmannら[5]は、弱くトンネル結合した2重量子井戸において、初期にどちらかの井戸の最低状態に粒子を置き、左右の井戸のエネルギーを交流外場により周期的に揺すってやると何が起こるかを数値計算で調べた。その結果、振動の振幅と振動数の比がある関係を満足すると、あたかもトンネル効果が凍結したかのように、波動関数の局在が起きることを見つけ、これをcoherent destruction of tunneling (CDT)と名づけた。CDTは、ナノ系における電子波の制御に利用できる可能性もあり、話題になった。

CDTの起きるメカニズムは簡単である。外場によるエネルギー変化の振幅が十分小さければ、左右の量子井戸のそれぞれに付随した最低準位だけを取り出して考えることが出来る。この状態をそれぞれ$|1\rangle$および

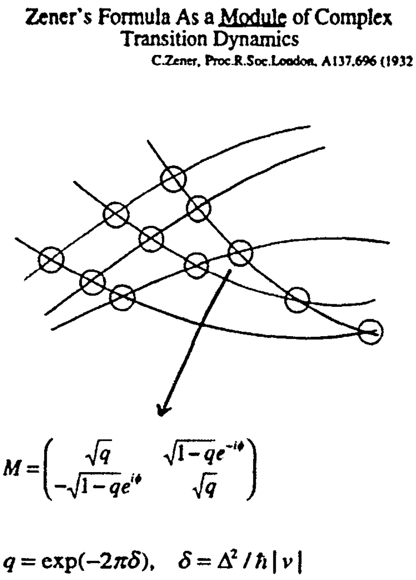


図2

$|2\rangle$とし、トンネル効果による非対角行列要素を$\Delta$とすれば、結局、ハミルトニアン

$$H(t)=\frac{1}{2}A\cos\omega t\left(|1\rangle\langle 1|-|2\rangle\langle 2|\right)+\Delta\left(|1\rangle\langle 2|+|2\rangle\langle 1|\right) \qquad (2)$$

で記述される量子駆動２準位系の問題に帰着できる。図３はそのエネルギー変化の模式図である。この系の時間発展は、転送行列$M$と、位相変化を表す対角行列の交互の積を繰り返しとることで記述できる[6]。とくに、どちらか一方の状態から出発したとき、最初の交差で図の矢印のように分岐した状態ベクトルが次の交差で混ぜられ、位相干渉により遷移確率は大きく変わる。これはMach-Zehnderの干渉計の時間軸版のようなものである。とくに準位交差間の経路の位相差がある条件を満たせば、完全にもとの状態に戻ることもある。CDTは、まさにこのような状況に対応していることが分かる。

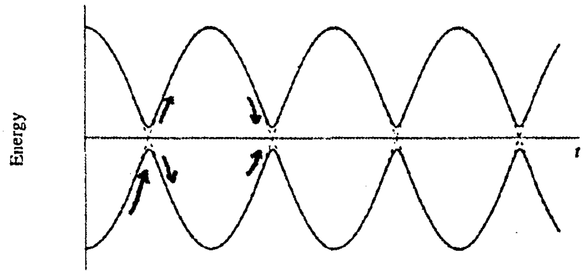


図３

4.2　周期的に変調されたLandau-Zener遷移

(1)式と(2)式を合わせたような次のハミルトニアンに従う駆動問題を考える[7]。

$$H(t)=\left(\frac{1}{2}vt-A\cos\omega t\right)\left(|1\rangle\langle 1|-|2\rangle\langle 2|\right)+\Delta\left(|1\rangle\langle 2|+|2\rangle\langle 1|\right) \qquad (3)$$

図４(a)はその透熱エネルギーの時間発展の様子である。遠い過去に系が$|1\rangle$にいたとして、時刻$t$で$|2\rangle$に移っている確率$P(t)$を調べてみる。図５(a)に示したのは$P(t)$の数値計算の結果である。ただし、横軸は規格化した時間であり、非対角行列要素$\Delta$と振動の振幅$A$はある値に固定して、振動数$\omega$だけを変化させた結果を示してある。上の図から下の図に行くに従い$\omega$が小さくなる順序に並べた。ただし$\omega$は、$\sqrt{v/\hbar}$で規格化して無次元化した値を図中に示してある。

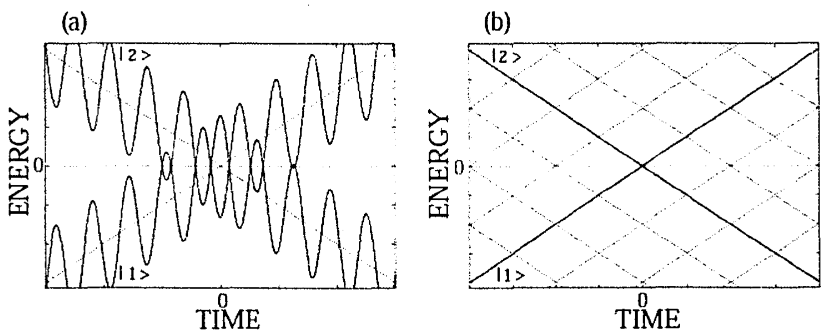


図４

$\omega$の大きい極限で階段関数的に$P(t)$が変化しているのは、振動外場が「量子化」されたことを意味している。この時、(3)式の振動項はあたかも量子エネルギー$\hbar\omega$の「フォトン場」のように振る舞い、準位交差の様子は図４の(b)のように多数のフォック状態同士の交差となる。そのために、一定の時間間隔で

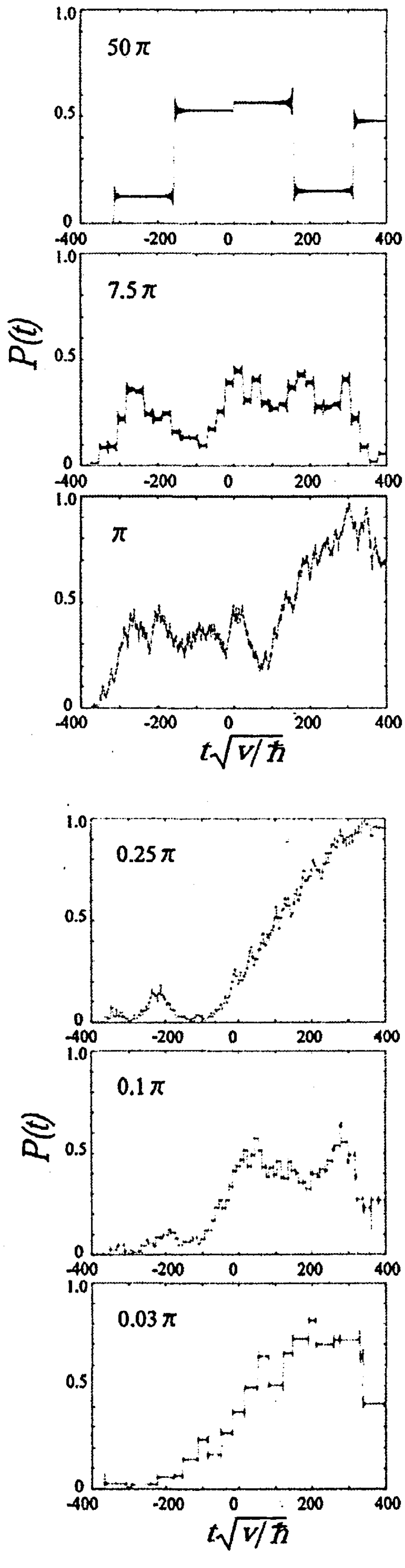


図５ (a)

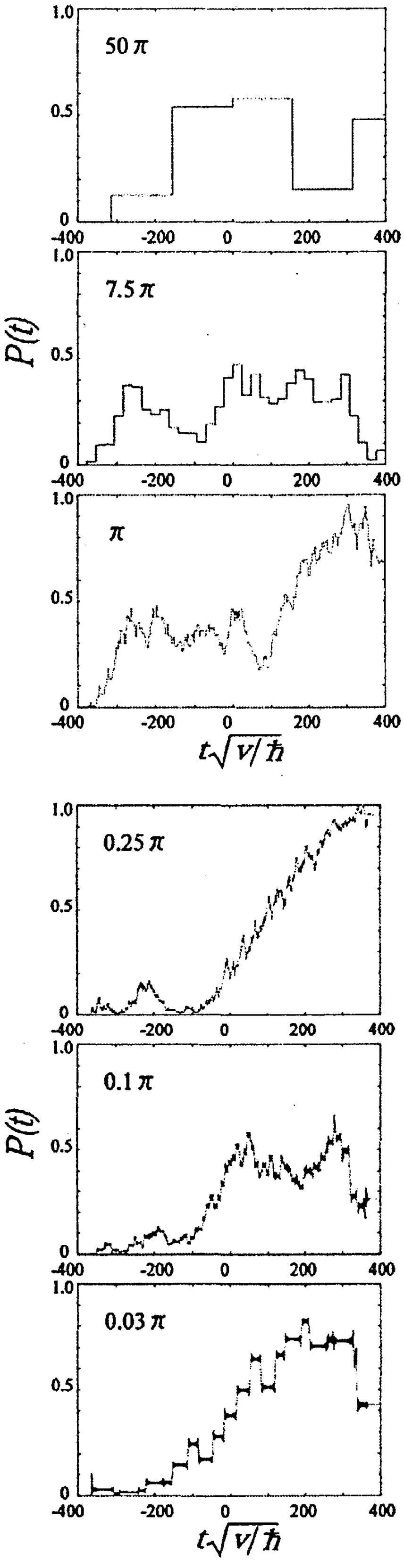


図５ (b)

Landau-Zener 遷移が起こる。 $\omega$が小さくなると、次第にジャンプの間隔が縮まり、ついには乱雑で予測不能の時間波形を示す。ところが、さらに$\omega$が小さくなった極限では再び階段関数的ジャンプが復活する。これは図４の(a)のように、本来の古典的振動によって、実際にエネルギー準位が交差した瞬間の Landau-Zener 遷移が見えてくるためである。

同じパラメータ値について、量子化された描像で時間発展をモジュール化し、転送行列の方法で$P(t)$を計算した結果を図５の(b)に示す。これは２行２列の行列の掛け算の結果である。厳密計算の結果を全領域でよく再現していることが分かる。驚くべきことに、$\omega$が非常に小さくなった極限(e)でさえ、厳密解をよく再現している。このパラメータ値では、交差と交差の時間間隔が 非常に短くなって、おのおのを独立した準位交差と近似するLandau-Zenerモデルによるモジュール化は成り立たないと思われるにも関わらずである。厳密解に見られる交差と交差の間の Rabi 振動までよくマネ（mimic）しているのは無気味ですらある。この予想を超える転送行列解析の有効性の理由は、まだよく分かっていない。

### 4.2 qubit gate への応用

このようなモジュール化と位相干渉効果を積極的に利用した応用例として、qubit の gate 操作を紹介する。現在、ジョセフソン量子箱[8]や半導体２重量子ドット[9]などでの qubit 操作が実現されているが、そのほとんどで、操作原理としては２準位共鳴における Rabi 振動の on-off 操作が想定されている。しかし、そのためには瞬時に on resonance 状態と off resonance 状態間の切り替えが必要であり、急峻な時間波形を持った gate 電圧の制御が要請され、将来的には困難をともなうことも予想される。

そこでわれわれ(Saito-Kayanuma[10])は、モジュール化された Landau-Zener 遷移と非断熱位相干渉を利用した全く新しい gate 操作 Correlated Landau-Zener gate (CLZ gate)を提案している。これは図６のように、２回の非断熱準位交差を行い、交差時における非断熱遷移と交差間に動力学位相の干渉効果を用いるものである。特に、１回の交差時における遷移確率がちょうど1/2になるように掃引速度を設定してやれば、動力学位相（交差間の２本のエネルギー曲線ではさまれた部分の面積 $S$）の調節によって、任意のユニタリ変換が実現できる。

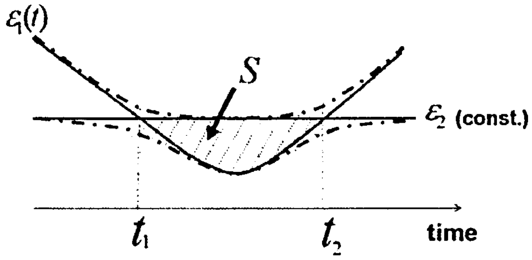


図６

図７はこの方法による qubit の反転操作の例である。$S$を変えることで、元に戻す操作（完全反射）ももちろん可能である。

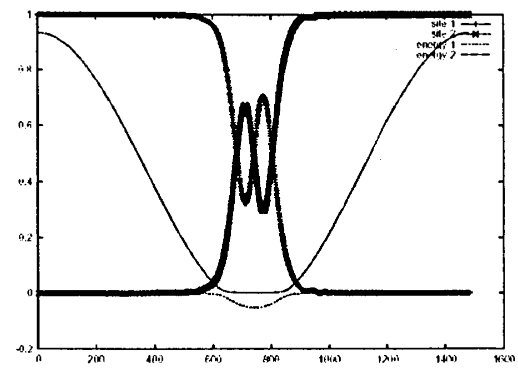

図７

CLZ gate は、Rabi振動による操作と異なり、準位交差時の状態遷移と、自由発展時の位相獲得との二つのモジュールに分解されている。このため、量子駆動の原理としては、Rabi 振動によるより遥かに大きな設計の自由度を有する。

qubit の実現にあたり、最も大きな障害となるのは媒質揺らぎによる decoherence である。特に、遅い揺らぎからくる decoherence は極低温まで残り、量子性の破れと gate 操作の誤差をもたらす。最近、われわれは CLZ gate を二つある方法で組み合わせることにより、この decoherence の悪影響を大幅に低減する方法を見つけた。詳細は講義で述べる。

## §5．厳密に解ける量子駆動問題

Landau-Zener のモデルは厳密に解ける量子駆動問題の例であるが、前に述べたように、次のハミルトニアンで記述される任意の時間波形を持つ駆動問題は２準位系といえども解けない。図７

$$H(t) = F(t)\left(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2|\right) + \Delta\left(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|\right) \qquad (4)$$

一方、次のハミルトニアンで記述される無限長１次元 tight binding モデルの時間発展は任意の時間波形に対して解ける[11]。

$$H(t) = F(t)\sum_m m|m\rangle\langle m| + \Delta\sum_m \left(|m\rangle\langle m+1| + |m+1\rangle\langle m|\right) \qquad (5)$$

これは時間に依存した一様な Stark 電場中の電子の運動を記述するハミルトニアンである。(5)が解けて(4)が解けない理由を考えると、「解ける量子駆動問題の特徴は何か？」という疑問に突き当たる。講義ではこれを Lee 代数の立場から考えてみる。

Lee 代数的には Landau-Zener 問題は su(2)のクラスに属する。Zener による厳密解を眺めると、それが c-数に対する方程式であることはどこにも使っていないことに気づく。したがって、su(2)の変換に従う線形演算子に対しても、転送行列による記述が成り立つ。このことから例えば次のようなハミルトニアンで記述されるボソン系の量子駆動問題が解けることが分かる。

$$H(t) = \frac{1}{2}vt\left(b_1^+ b_1 - b_2^+ b_2\right) + \Delta\left(b_1^+ b_2 + b_2^+ b_1\right) \qquad (6)$$

これは図８のような２重井戸にトラップされた理想ボーズ粒子のダイナミックスが厳密に解けることを意味する。

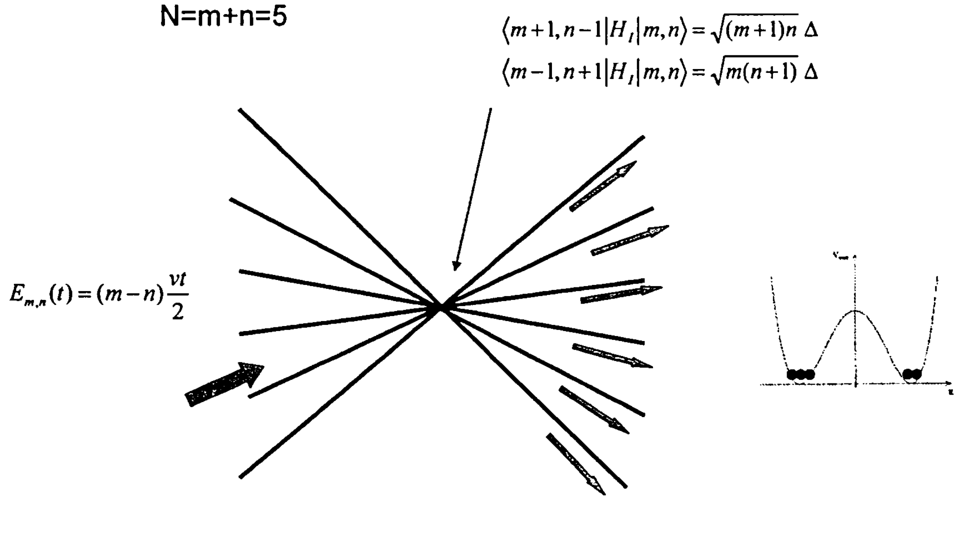


図８

§6．今後の展望

以上は基本的には相互作用を持たない粒子系の量子駆動ダイナミックスの話であったが、強く相互作用しあう多粒子系の量子駆動問題も次の課題として考えられる。例えば、強相関Mott-Hubbard絶縁体に強い時間依存外場がかけられたときに何が起きるだろうか？（現在では強レーザー技術で原子内クーロン力に匹敵する外力ポテンシャルを加えることも可能である。）また、閉じた系だけではなく、リードを接続した量子ドットのような開いた系に時間依存外場を加えて電流の制御をするにはどうしたらよいだろうか？等々疑問がわいてくる。量子駆動問題は多くの発展性を秘めた課題といえるだろう。

**文献**

[1] L. Landau, Phys. Z. Sowjetunion, **2**, 46 (1932).
[2] C. Zener, Proc. R. Soc. London, Ser. A **137**, 696 (1932).
[3] Y. Kayanuma, Phys. Rev. B**47**, 9940 (1993).
[4] Y. Kayanuma, Phys. Rev. A **55**, R2495 (1997).
[5] F. Grossmann, T. Dittrich, P. Jung and P. Hanggi, Phys. Rev. Lett. **67**, 516 (1991).
[6] Y. Kayanuma, Phys. Rev. A**50**, 843 (1994).
[7] Y. Kayanuma and Y. Mizumoto, Phys. Rev. A **62** , 61401(R) (2000) .
[8] Y. Nakamura et al. Nature (London) **398**, 786 (1999).
[9] T. Hayashi et al., Phys. Rev. Lett. **91**, 226804 (2003).
[10] K. Saito and Y. Kayanuma, Phys. Rev. B**70**, 201304(R) (2004).
[11] D. Dunlap and V. Kenkre, Phys. Rev. B**34**, 3625 (1986).